



TITLE:

1. 小さな球状蛋白質,Basic Pancreatic Trypsin Inhibitorの規準 振動解析(修士論文アブストラクト (1982年度))

AUTHOR(S):

西川, 哲夫

CITATION:

西川, 哲夫. 1. 小さな球状蛋白質,Basic Pancreatic Trypsin Inhibitorの規準振動解析(修士論文アブストラクト(1982年度)). 物性研究 1983, 40(3): 331-332

ISSUE DATE:

1983-06-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91030>

RIGHT:

定を行ない、格子振動を調べた。多結晶試料については x の全域で固溶体を得られたが、それを出発物質として化学気相輸送法によって得られた単結晶の Cr 濃度 x は、0, 0.01, 0.05, 0.10, 0.15, 0.2, 0.26, 0.93, 1.0 であった。得られた単結晶試料によるラマン散乱スペクトル測定の結果、5つの活性モードのうち3つのモードに関しては $0 \leq x \leq 0.26$ の領域で観測され、中心振動数と幅の x 依存性において、シフト、幅ともにほとんど変化しないものと大きく変化するものの2種類に明瞭に分かれた。 $0.93 \leq x \leq 1.0$ では、どのモードも x の減少に伴って低振動数側へ変化した。実験結果をスピネル格子に一般的に用いられるモデル計算と比較する。

○九州大学理学部物理学教室

1. 小さな球状蛋白質, Basic Pancreatic Trypsin Inhibitor の規準振動解析

西川哲夫

2. カオスの中の秩序運動

吉武伸之

3. 高分子におけるくりこみ群

柴田博史

4. 低温トンネル効果による分子励起状態のスペクトル測定

千葉玲一

5. LaNbO_4 の強弾性相転移における音響型ソフトモードの研究

原一広

6. 気圧掃引型平面ファブリ・ペロ干渉分光計の試作並びにそれを用いた

強誘電体 $\text{NaD}_3(\text{SeO}_3)_2$ のブリルアン散乱による研究

山口博幸

7. 強磁場中の半金属内電子-正孔間相互作用に関する実験的研究

小山健一

8. 高磁場超電導体の製作とその超電導特性に関する実験的研究

松野信也

9. Mn・Ni 合金におけるマルテンサイト変態

副島雄児

1. 小さな球状蛋白質, Basic Pancreatic Trypsin Inhibitor の規準振動解析

西川哲夫

58 残基から成る球状蛋白質, BPTI, (Basic Pancreatic Trypsin Inhibitor) の内部運動の様子を規準振動解析によって調べた。BPTI を次のような力学系として扱った。i) 水素結

合に関与しない原子は陽に扱わない, ii) 独立変数は回転し得る 2 面角のみ, iii) 相互作用として, Lenard-Jones 相互作用, 静電相互作用, 水素結合, S-S 結合を考える。iv) 溶媒の効果は考慮しない。この力学系におけるエネルギー極小の点を求め, その点で運動エネルギーと位置エネルギーについての H 行列と F 行列を計算し, 両方の行列を同時に対角化することにより, 規準振動モードを求めた。得られた規準振動モードの特徴は以下のとおりである。

- (1) 振動数分布の区間は, $5\text{ cm}^{-1} \sim 670\text{ cm}^{-1}$ で 120 cm^{-1} 以下に約 70% のモードが存在する。
- (2) 各モードは振動数の大きさによって特徴が異なる。
 - i) 高振動モードでは, 運動は局在化している。
 - ii) 低振動モードでは, 運動は分子全体に広がっていて, しかも, 原子の動きのベクトルの空間的変化は連続的である。又, 熱平衡における原子の平均二乗変位への寄与が大きい。

2. カオスの中の秩序運動

吉 武 伸 之

乱流発生に対する quadratic model のように一次元差分系は, 力学系の新しい性質の発見や理解に役立つ。quadratic model の nonchaos から chaos への転移や chaos の発達, 周期軌道の発生の仕方と強く結びついていると考えられる。

quadratic model やその直線近似したテント変換は, Sharkovskii の順序によって, 不連続な一次元差分系である β 変換は Takahashi 順序によって, 周期軌道の発生の仕方は, 支配されている。

そこで, 安定な 2 周期軌道から chaos へ転移し, Sharkovskii や Takahashi 順序とは別の順序をもった一次元差分系について, chaos の発達やパワースペクトラムの変化をその順序による周期軌道の発生と関連させて調べた。

周期軌道の中で最後に消えるタイプの周期軌道を minimal orbit というが, この一次元差分系においては, 不変密度・自己相関関数・パワースペクトラムの変化から次のことが期待される。

- (1) カオスの発達の仕方は, 周期軌道の発生の仕方とその周期軌道の性質による。即ち, 順序関係と minimal orbit のタイプに支配されている。
- (2) 転移点支傍において, 2 周期を除いた最小の周期の minimal orbit の近傍に相似性が成